2. Γράφομε τις ανωτέρω σχέσεις για $q = 1,...M$ σε διανυσματική μορφή :

$$2\mathbf{m} = \mathbf{G}^T \boldsymbol{\lambda} \tag{3.30}$$

3. Επειδή ισχύει παράλληλα και $\mathbf{d} = \mathbf{Gm}$, αντικαθιστώντας το $\mathbf{m}$ από την 3.30 στην αρχική εξίσωση παίρνομε :

$$\mathbf{d} = \mathbf{G}\left[\mathbf{G}^T \boldsymbol{\lambda} / 2\right] \tag{3.31}$$

4. Εάν ο πίνακας $\mathbf{GG}^T$ που έχει διαστάσεις M x M αντιστρέφεται, μπορούμε να εκφράσομε μέσω αυτού τους πολλαπλασιαστές Lagrange.

$$\boldsymbol{\lambda} = 2\left[\mathbf{GG}^T\right]^{-1} \mathbf{d} \tag{3.32}$$

5. Με αντικατάσταση της 3.32 στην 3.30 παίρνομε τη λύση (ελαχίστου μήκους)

$$\mathbf{m}^{est} = \mathbf{G}^T \left[\mathbf{GG}^T\right]^{-1} \mathbf{d} \tag{3.33}$$

Ως προς την αντιστρεψιμότητα του πίνακα $\mathbf{GG}^T$, από τη Γραμμική Άλγεβρα γνωρίζομε ότι αρκεί οι γραμμές του $\mathbf{G}$ να είναι γραμμικά ανεξάρτητες. Αυτό όμως εξασφαλίζεται από την υπόθεση για ένα καθαρά υπο-ορισμένο αντίστροφο πρόβλημα χωρίς ασυνέπειες.

<u>ΑΣΚΗΣΗ</u> Επιλύστε το πρόβλημα 3.26 με την αρχή του ελαχίστου μήκους.

3.6 Μεικτά ορισμένα προβλήματα

Τα περισσότερα διακριτά αντίστροφα προβλήματα δεν είναι ούτε καθαρά υπο-ορισμένα, ούτε καθαρά υπερ-ορισμένα. Εάν υπήρχε η δυνατότητα οι άγνωστες παράμετροι να ομαδοποιηθούν έτσι ώστε να οριστούν δύο ομάδες από τις οποίες η πρώτη να έχει τις παραμέτρους που με βάση τις μετρήσεις είναι υπερ-ορισμένες και στην άλλη να έχομε τις υπο-ορισμένες παραμέτρους, θα ήταν θεωρητικά εφικτό να δημιουργήσομε ένα νέο γραμμικό σύστημα $\mathbf{Gm} = \mathbf{d} \rightarrow \mathbf{G'm'} = \mathbf{d'}$ όπου ο νέος πίνακας $\mathbf{G'}$ μπορεί να διαχωριστεί ως :

$\mathbf{G'} \rightarrow \begin{bmatrix} \mathbf{G^o} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{G^u} \end{bmatrix}$ έτσι ώστε το γραμμικό σύστημα να πάρει τη μορφή :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{G^o} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{G^u} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{m^0} \\ \mathbf{m^u} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{d^0} \\ \mathbf{d^u} \end{bmatrix} \tag{3.34}$$

με τους δείκτες o και u να υποδηλώνουν το υπερορισμένο (**o**verdetermined) και υπο-ορισμένο (**u**nderdetermined) τμήμα του προβλήματος. Στην περίπτωση αυτή μπορεί κανείς να λύσει το πρόβλημά του χωριστά για το υπερορισμένο και υποορισμένο τμήμα με τεχνικές όπως αυτές που αναφέραμε ήδη.

Μια δυνατότητα αυτής της μορφής δεν πάντα εύκολη. Μπορούμε όμως να ορίσουμε μια αντικειμενική συνάρτηση που να λαμβάνει υπ’ όψιν της τόσο το κριτήριο των ελαχίστων τετραγώνων όσο και το κριτήριο του ελάχιστου μήκους (ή κάτι ανάλογο). Μια συνάρτηση αυτής της μορφής είναι η :

$$\Phi(\mathbf{m}) = E + \varepsilon^2 L = \mathbf{e}^T\mathbf{e} + \varepsilon^2 \mathbf{m}^T\mathbf{m} \tag{3.35}$$

όπου ο συντελεστής ε^2 ορίζει τη σχετική βαρύτητα που έχουν τα ελάχιστα τετράγωνα σε σχέση με το ελάχιστο μήκος. Εάν ο συντελεστής αυτός είναι μεγάλος, τονίζεται το υποορισμένο τμήμα του προβλήματος αφού η ελαχιστοποίηση της Φ μας οδηγεί σε λύσεις ελαχίστου μήκους. Εάν πάλι είναι μικρός, τονίζεται η λύση ελαχίστων τετραγώνων και εάν τείνει στο 0 δεν λαμβάνεται ουσιαστικά υπ΄όψιν ο περιορισμός του μήκους των παραμέτρων. Είναι προφανές ότι από την εμπειρία σε ορισμένα προβλήματα μπορεί να οριστεί κατάλληλο ε ανά περίπτωση.

Παραγωγίζοντας την Φ ως προς τις παραμέτρους m με διαδικασία ανάλογη με αυτές που παρουσιάσαμε, οδηγούμαστε στην έκφραση της λύσης για τις παραμέτρους **m** ως

$$\mathbf{m}^{est} = [\mathbf{G}^T\mathbf{G} + \varepsilon^2\mathbf{I}]^{-1}\mathbf{G}^T\mathbf{d} \tag{3.36}$$

όπου **I** είναι ο διαγώνιος μοναδιαίος πίνακας MxM.

Η λύση αυτή ονομάζεται *λύση ελαχίστων τετραγώνων με απόσβεση (damped least square solution)* μια και μέσω του ε, έχει «αποσβεσθεί» η επίδραση του υπο-ορισμένου τμήματος του προβλήματος.

3.7 Λύσεις αντιστρόφων προβλημάτων με χρήση ζυγισμένων μετρικών μήκους

Σε πολλές περιπτώσεις (μάλλον στις περισσότερες) η αρχή του ελαχίστου μήκους δεν είναι ικανοποιητική ακόμη και σε ένα καθαρά υπο-ορισμένο πρόβλημα αφού αναφέρεται σε ειδική περίπτωση φυσικής ερμηνείας των προς ανάκτηση παραμέτρων. Εάν όμως υπάρχει πληροφορία ότι οι προς ανάκτηση παράμετροι εκφράζουν ένα φυσικό μέγεθος του οποίου γνωρίζομε (για παράδειγμα) τη μέση τιμή, ή μια τιμή κοντά στην πραγματική για όλες τις παραμέτρους, είναι φυσικό να περιμένουμε οι προς ανάκτηση παράμετροι να μην απέχουν πολύ από αυτή. Δημιουργούμε λοιπόν μία καινούργια νόρμα μήκους L' οριζόμενη από τη σχέση :

$$L' = (\mathbf{m} - \langle\mathbf{m}\rangle)^T(\mathbf{m} - \langle\mathbf{m}\rangle) \tag{3.37}$$

όπου με $\langle \mathbf{m} \rangle$ συμβολίζομε τις εκ προοιμίου (a priori) γνωστές τιμές της παραμέτρου $\mathbf{m}$. Η ελαχιστοποίηση της νέας αυτής νόρμας θα μας δώσει τις λύσεις που θα απέχουν το ελάχιστο από τις γνωστές τιμές.

Πρόσθετη πληροφορία μπορούμε να έχομε σε ό,τι αφορά την ομαλότητα των παραμέτρων. Δηλαδή το πόσο μεταβάλλονται οι γειτονικές παράμετροι (m_j σε σχέση με την m_{j+1} αλλά και με την m_{j-1}).. Ένα μέτρο για αυτή τη μεταβολή είναι η διαφορά $m_j - m_{j-1}$, Η διαφορά αυτή προκύπτει από την έννοια της σχέσης διαφορών πρώτης τάξης για διακριτές συναρτήσεις. Εάν επιθυμούμε ομαλότητα μεγαλύτερης τάξης, μπορούμε να ανατρέξουμε στις σχέσεις διαφορών δεύτερης τάξης που είναι $m_{j-1} - 2m_j + m_{j+1}$. Οι σχέσεις αυτές προέρχονται από αναπτύγματα Taylor που χρησιμοποιούνται για να προσεγγίσει κανείς πρώτες και δεύτερες παραγώγους συνεχών συναρτήσεων με διακριτό τρόπο. Μικρές τιμές παραγώγων λοιπόν σημαίνουν μικρές διαφορές και ομαλές μεταβολές των τιμών των συναρτήσεων. Στην περίπτωσή μας μικρές διαφορές σημαίνουν ομαλές μεταβολές παραμέτρων.

Η ομαλότητα λοιπόν μπορεί να εκφραστεί μέσω σχέσεων της μορφής :

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & . & . & & & & \\ 0 & -1 & 1 & 0 & . & & & & \\ & & . & . & . & . & & & \\ & & & . & . & . & . & & \\ & & & & & . & . & . & 0 \\ & & & & & . & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ . \\ . \\ . \\ m_M \end{bmatrix} = \mathbf{Dm} \qquad (3.38)$$

ή

$$\mathbf{I}' = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & 0 & . & & & & \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & & & & \\ & & . & . & . & . & & & \\ & & & . & . & . & . & & \\ & & & & & . & . & . & 0 \\ & & & & & 0 & 1 & -2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ . \\ . \\ . \\ m_M \end{bmatrix} = \mathbf{D}'\mathbf{m} \qquad (3.39)$$

όπου $\mathbf{D}$ και $\mathbf{D}'$ είναι πίνακες ομαλότητας (flatness matrices) για τις περιπτώσεις που αναφέραμε παραπάνω.

Θεωρώντας τώρα μια καινούργια μέτρηση μήκους από τη σχέση :

$$L^w = \mathbf{I}^T\mathbf{I} = [\mathbf{Dm}]^T [\mathbf{Dm}] = \mathbf{m}^T\mathbf{D}^T\mathbf{Dm} = \mathbf{m}^T\mathbf{W}_m\mathbf{m} \ , \qquad (3.40)$$

μπορούμε να την αντικαταστήσομε στις προηγούμενες εκφράσεις που είδαμε και στις οποίες υπήρχε μέτρηση μήκους παραμέτρων, προκειμένου να εξασφαλίσουμε και την ισχύ του πρόσθετου περιορισμού της ομαλότητας. Η νέα όμως μέτρηση μήκους δεν είναι κανονική νόρμα, αφού μπορεί να πάρει μηδενική τιμή και για μη μηδενικά διανύσματα **m** (π.χ. για διανύσματα ίσων όρων). Ο πίνακας $\mathbf{W}_m = \mathbf{D}^T\mathbf{D}$ είναι ένας όρος ζύγισης (**w**eighting factor). Ο όρος αυτός μπορεί να εισαχθεί και σε άλλες μετρήσεις μήκους όπως η L' (3.37), και να μας οδηγήσει σε λύσεις επαρκούς ομαλότητας κοντά σε αρχικές (γνωστές) τιμές παραμέτρων

$$L'^{w} = (\mathbf{m} - \langle \mathbf{m} \rangle)^T \mathbf{W}_m (\mathbf{m} - \langle \mathbf{m} \rangle) \tag{3.41}$$

Τέλος να σημειώσουμε ότι ανάλογος όρος ζύγισης μπορεί να εισαχθεί και στη λύση ελαχίστων τετραγώνων όταν υπάρχει πληροφορία π.χ. για αυξημένη ακρίβεια κάποιας μέτρησης. Τότε η μέτρηση αυτή μπορεί να ληφθεί περισσότερο υπ' όψιν με κατάλληλη ζύγιση της σημασίας της. Δημιουργούμε έτσι ένα καινούργιο διαγώνιο πίνακα με μη μηδενικά στοιχεία 1 και μεγαλύτερα (ή μικρότερα) του 1 ανάλογα με την αξιοπιστία των μετρήσεων. Ο όρος ζύγισης στην περίπτωση αυτή συμβολίζεται με $\mathbf{W}_e$ και το λάθος εκτίμησης γίνεται $E^w = \mathbf{e}^T \mathbf{W}_e \mathbf{e}$.

Στα επόμενα πινακοποιούμε τις λύσεις που έχομε δεί μέχρι τώρα όταν χρησιμοποιηθεί ο πίνακας ζύγισης.

Λύση ελαχίστων τετραγώνων $\Longrightarrow$ **Καθαρά υπερ-ορισμένο πρόβλημα**

Ελαχιστοποίηση της $E^w = \mathbf{e}^T \mathbf{W}_e \mathbf{e}$

$$\mathbf{m}^{est} = \left[\mathbf{G}^T \mathbf{W}_e \mathbf{G}\right]^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{W}_e \mathbf{d}$$

Λύση ελαχίστου μήκους με a-priori πληροφορία $\Longrightarrow$ **Καθαρά υπο-ορισμένο πρόβλημα**

Ελαχιστοποίηση της $L'^{w} = (\mathbf{m} - \langle \mathbf{m} \rangle)^T \mathbf{W}_m (\mathbf{m} - \langle \mathbf{m} \rangle)$

$$\mathbf{m}^{est} = \langle \mathbf{m} \rangle + \mathbf{W}_m \mathbf{G}^T \left[\mathbf{G}\mathbf{W}_m \mathbf{G}^T\right]^{-1} \left[\mathbf{d} - \mathbf{G}\langle \mathbf{m} \rangle\right]$$

Λύση ελαχίστων τετραγώνων με a-priori πληροφορία και απόσβεση $\Longrightarrow$ **Μεικτό πρόβλημα**

Ελαχιστοποίηση της $\Phi' = E^w + \varepsilon^2 L'^{w}$

$$\mathbf{m}^{est} = \langle \mathbf{m} \rangle + \mathbf{W}_m^{-1} \mathbf{G}^T \left[\mathbf{G}\mathbf{W}_m^{-1} \mathbf{G}^T + \varepsilon^2 \, \mathbf{W}_e^{-1}\right]^{-1} \left[\mathbf{d} - \mathbf{G}\langle \mathbf{m} \rangle\right]$$

Φυσικά όλες οι παραπάνω σχέσεις δίδονται με την υπόθεση ότι υπάρχουν οι αναφερόμενοι αντίστροφοι πίνακες.

3.8 Άλλοι τύποι εκ προοιμίου (a-priori) πληροφορίας.

Υπάρχουν περιπτώσεις αντιστρόφων προβλημάτων στις οποίες γνωρίζομε ότι ισχύει μία σχέση ανάμεσα στις παραμέτρους. Σχέσεις της μορφής $\mathbf{Fm} = \mathbf{h}$ είναι σχετικά εύκολο να εισαχθούν στο πρόβλημα. Εάν για παράδειγμα δεχτούμε ότι ο μέσος όρος των παραμέτρων είναι γνωστός και παίρνει την τιμή h_1 έχομε :

$$\mathbf{Fm} = \frac{1}{M}\begin{bmatrix} 1 & 1 & . & . & . & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ . \\ . \\ . \\ m_M \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_1 \end{bmatrix} = \mathbf{h} \qquad (3.42)$$

Μια άλλη ανάλογη περίπτωση είναι όταν γνωρίζομε ότι μια συγκεκριμένη παράμετρος (ας πούμε η m_j) παίρνει δεδομένη τιμή. Αυτό το πρόβλημα δεν μπορεί πολλές φορές να αντιμετωπισθεί με εξαίρεση της δεδομένης παραμέτρους από την διατύπωση του αντιστρόφου προβλήματος, όπως θα μπορούσε να φανταστεί κανείς. Στην περίπτωση αυτή, έχομε μια απλή διατύπωση της γραμμικής σχέσης :

$$\mathbf{Fm} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & . & 1 & . & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ . \\ m_j \\ . \\ m_M \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_1 \end{bmatrix} = \mathbf{h} \qquad (3.43)$$

Πολλές φορές ζητάμε την επίλυση ενός αντίστροφου γραμμικού προβλήματος με την αρχή των ελαχίστων τετραγώνων, γνωρίζοντας ότι θα πρέπει οι παράμετροι να σχετίζονται με σχέσεις της μορφής $\mathbf{Fm} = \mathbf{h}$. Αυτού του είδους τα προβλήματα μπορούμε να τα αντιμετωπίσουμε είτε προσθέτοντας τις παραπάνω εξισώσεις ως γραμμές στο σύστημα $\mathbf{Gm} = \mathbf{d}$ και ορίζοντας τον πίνακα ζύγισης $\mathbf{W}_e$ ώστε αυτές οι εξισώσεις να έχουν περισσότερο βάρος (ιδανικά άπειρο) σε σχέση με τις υπόλοιπες, είτε με τους πολλαπλασιαστές Lagrange. Θα αναφερθούμε στην τελευταία αυτή περίπτωση :

Ζητάμε την επίλυση ενός αντιστρόφου γραμμικού προβλήματος έτσι ώστε να ελαχιστοποιείται το «λάθος» $E = \mathbf{e}^T\mathbf{e}$ με τον περιορισμό : $\mathbf{Fm} - \mathbf{h} = 0$. Ορίζουμε τη συνάρτηση :

$$\mathbf{\Phi(m)} = \sum_{i=1}^{N} \left[d_i - \sum_{j=1}^{M} G_{ij} m_j \right]^2 + 2\sum_{i=1}^{p} \lambda_\iota \left[\sum_{j=1}^{M} F_{ij} m_j - h \right], \tag{3.44}$$

όπου έχομε p περιορισμούς και λ_ι είναι οι πολλαπλασιστές Lagrange.

Παραγωγίζοντας ως προς τις παραμέτρους και ζητώντας οι παράγωγοι να είναι 0, παίρνομε :

$$\frac{\partial \mathbf{\Phi(m)}}{\partial m_q} = 2\sum_{i=1}^{M} m_i \sum_{j=1}^{N} G_{jq} G_{ji} - 2\sum_{i=1}^{N} G_{iq} d_i + 2\sum_{i=1}^{p} \lambda_\iota F_{iq} = 0, \quad q = 1,...M\ . \tag{3.45}$$

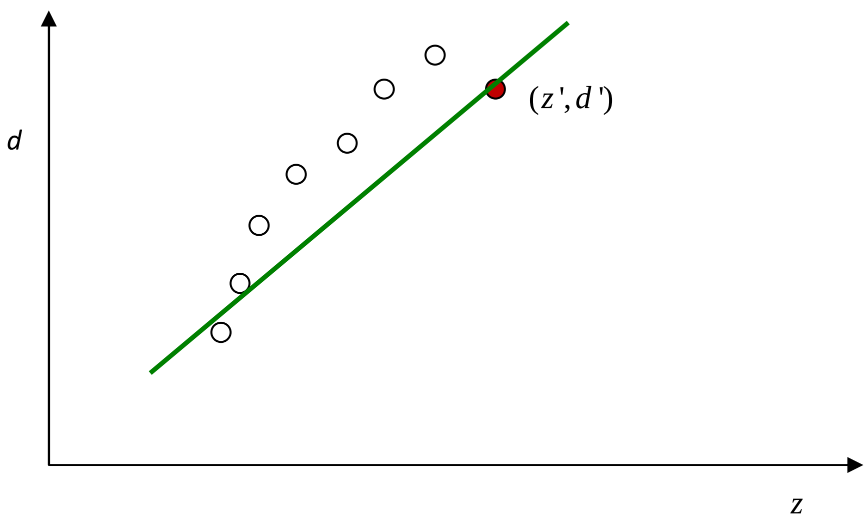
Στις ανωτέρω M εξισώσεις προστίθενται και οι p εξισώσεις των περιορισμών για να πάρομε το σύστημα :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{G}^T\mathbf{G} & \mathbf{F}^T \\ \mathbf{F} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{m} \\ \boldsymbol{\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}^T\mathbf{d} \\ \mathbf{h} \end{bmatrix} \tag{3.46}$$

που επιλυόμενο μας δίδει τόσο τις προς ανάκτηση παραμέτρους όσο και τους πολλαπλασιαστές Lagrange.

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ **Υπολογισμός της εξίσωσης ευθείας όταν αυτή περνά από δεδομένο σημείο.**

Θεωρείστε το πρόβλημα του υπολογισμού των παραμέτρων της εξίσωσης ευθείας $y = m_1 + m_2 z$ όταν γνωρίζομε ότι αυτή θα πρέπει να περνά από το ζεύγος των σημείων (z', d'), όπως αποτυπώνεται στο σχήμα 3.4



Σχήμα 3.4 Υπολογισμός εξίσωσης ευθείας που περνά από το σημείο (z', d')

Στην περίπτωσή μας έχομε $p = 1$ περιορισμό της μορφής :

$$d' = m_1 + m_2 z' \tag{3.47}$$

που γράφεται ως :

$$\mathbf{Fm} = [1 \quad z'] \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \end{bmatrix} = [d'] = h . \tag{3.48}$$

Η εξίσωση 3.46 στην περίπτωση αυτή χρησιμοποιώντας τους πίνακες που είδαμε στην παράγραφο 3.4.1 γράφεται ως :

$$\begin{bmatrix} N & \Sigma z_i & 1 \\ \Sigma z_i & \Sigma z_i^2 & z' \\ 1 & z' & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma d_i \\ \Sigma z_i d_i \\ d' \end{bmatrix} \tag{3.49}$$

και ο υπολογισμός των παραμέτρων και του μοναδικού συντελεστού Lagrange δίδεται από τη σχέση :

$$\begin{bmatrix} m_1^{est} \\ m_2^{est} \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N & \Sigma z_i & 1 \\ \Sigma z_i & \Sigma z_i^2 & z' \\ 1 & z' & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \Sigma d_i \\ \Sigma z_i d_i \\ d' \end{bmatrix} \tag{3.50}$$